



TITLE:

STMにおける量子干渉効果 : STMで分子軌道の相対位相の違いは見えるか?(第42回 物性若手夏の学校(1997年度))

AUTHOR(S):

加藤(荒), 則彦; 原, 正彦; 雀部, 博之; Knoll, W.

CITATION:

加藤(荒), 則彦 ...[et al]. STMにおける量子干渉効果 : STMで分子軌道の相対位相の違いは見えるか?(第42回 物性若手夏の学校(1997年度)). 物性研究 1997, 69(3): 575-575

ISSUE DATE:

1997-12-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/96184>

RIGHT:

真空紫外逆光電子分光装置の開発と希土類化合物の逆光電子分光

山本卓志、谷口克哉、水田宗徳、鈴木章二、佐藤繁

東北大学院理学研究科

電子状態を測定する有力な手段として光電子分光がある。光電子分光は様々な物質に対して測定がなされ、大きな研究成果があげられている。ただし、光電子分光は電子の占有状態しか測定することができない。

これに対し、電子の非占有状態を測定する手段として逆光電子分光がある。光電効果と時間反転の関係にある逆光電効果を使い測定するのであるが、散乱断面積が光電効果の $10^4 \sim 10^5$ と小さいために発展は遅れてきた。

我々は東北大学において真空紫外領域の逆光電子分光装置を建設してきた。分光学的問題から一般的に逆光電子分光装置は大型なものが多い。しかし我々の装置は Rowland 円を用いずに分光する手段によって、比較的小型なものとなっている。

装置は試料室と分光室からなり、ゲートを閉じることによって分光室の真空を保ちながら試料を取り替えることができる。試料室は我々のチームが作製した Piece タイプの電子銃、試料のホルダー、試料の汚れなどを測定するための Auger 装置などが存在する。Piece タイプの電子銃は低電圧でも大電流が取り出せるという特性がある。分光室は集光させるためのトロイダルミラー、分光のための球面回折格子、分光された光を測定する検出器からなる。回折格子は分光する光の範囲によって様々な特性があるため、複数個のものを使用できるようになっており、それらは真空中で取り替え可能となっている。

STM における量子干渉効果 — STM で分子軌道の相対位相の違いは見えるか？ —

理研フロンティア 加藤（荒）則彦、原正彦、雀部博之、W. Knoll

STM の理論で通常出発点とされる摂動論を基礎にした transfer-Hamiltonian 法 (TH法) では、探針-試料間距離が大きくその間の相互作用は無視できることを仮定している。しかしながら、この仮定に反すると思われる像がかなり報告されており、それらはその相互作用に起因すると一般に認識されている。そのため探針-試料間相互作用を取り入れた理論が精力的に研究されている。TH法ではトンネル確率に試料の波動関数の位相情報は現われてこない。例えば有機導体の場合、その構成有機分子の分子軌道内の相対位相 (符号) の違いはトンネル電流には現われないことになる。

演者らは数年来STMにより擬1次元有機導体 Tetrachiafulvalene-Tetracyanoquinodimethane (TTF-TCNQ) の測定を行ってきた。その結果、TTF-TCNQでは2種類の分子像が得られることを報告した¹⁾。TTF-TCNQ は電荷移動錯体のため、STM のトンネル電流にかかわる電子のフェルミエネルギー近傍の結晶軌道関数は、TTF カラムでは TTF 分子の最高被占分子軌道 (HOMO) の1次結合、TCNQ カラムでは TCNQ 分子の最低空分子軌道 (LUMO) の1次結合で近似できる。2種類の分子像は TTF 分子の HOMO あるいは TCNQ 分子の LUMO 内の2種類の相対位相の違いが STM 像に現われていると解釈するとその特徴が非常によく説明できる²⁾。

この報告では、分子性結晶の構成分子の分子軌道内の相対位相の違いがSTM像に現われるメカニズムについて議論する。

探針-試料間距離が小さいとき (3~4 Å 以下)、トンネル障壁近傍での多重散乱が大きくなり、それにより探針の近傍では試料の波動関数は探針の波動関数と混合して結合あるいは反結合的な性質をもった局在状態が形成される。このときトンネリングはこの局在状態を経由した共鳴トンネリングが支配的になる。局在状態のこの結合あるいは反結合的な性質は分子性結晶の構成分子の分子軌道内の相対位相の違いを反映したものであり、このような量子的干渉が像に相対位相の違いが現われる起因となると思われる。

我々のメカニズムでは試料と探針の波動関数の量子的干渉を基礎にしているので、トンネル障壁での電子の輸送現象がコヒーレントであることを前提にしている。探針は走査することにより試料表面のある分子に接近した後一度離れて再び戻ってくるが、そのときなぜ探針はその分子の相対位相を記憶しているのかなどについても議論する。

1) N.Ara, H.Shigekawa, K.Yase, M.Yoshimura, and A.Kawazu, Appl.Phys.Lett. **66** (1995) 327

2) N.A.Kato, M.Hara, H.Sasabe, and W.Knoll, Nanotechnology, **7** (1996) 122